Brownian Movement の量子論

竹　山　尚　賢（九大・工・応化）

（１月２２日受理）

任意の observable の演算子Ａの時間変化は次の Heisenberg の運動方程式によつて記述される。

$$\frac{dA}{dt} = i\hbar^{-1}[H, A] \equiv i\omega^{X} A \tag{1}$$

これの形式解は、次式により与えられる。

$$A(t) = \exp(itH/\hbar)A(0)\exp(-itH/\hbar)$$
$$= \exp(it\omega^{X})A(0) \tag{2}$$

ここに ω^{X} は遷移の角振動数演算子である。

演算子ヒルベルト空間の部分空間への射影演算子Ｐを用いて、Ａを次のように一意的に分解することができる。

$$A = PA + (1-P)A = \overline{A} + A' \tag{3}$$

ただし、(1−P) は、Ｐにより切り出された部分空間の直交補空間への射影演算子であり、

$$PA \equiv \overline{A}, \quad (1-P)A \equiv A' \tag{4}$$

を定義した。

Zwanzig の方法[1]によつて、(1)から次の連立方程式がえられる。

$$\frac{d\overline{A}}{dt} = iP\omega^{X}(\overline{A} + A') \tag{5.a}$$

$$\frac{dA'}{dt}=i(1-P)\omega^{X}(\overline{A}+A') \tag{5.b}$$

Laplace 変換

$$A(s)=\int_{0}^{\infty}dt\ e^{-st}A(t), \quad (\mathscr{R}e\ s>0) \tag{6}$$

によつて (5.ab) は次式となる。

$$s\overline{A}(s)-\overline{A}(0)=iP\omega^{X}\{\overline{A}(s)+A'(s)\} \tag{7.a}$$

$$sA'(s)-A'(0)=i(1-P)\omega^{X}\{\overline{A}(s)+A'(s)\} \tag{7.b}$$

まず、(7.b)から、$A'(s)$ を求める。

$$\begin{aligned}A'(s)=&[s-i(1-P)\omega^{X}]^{-1}A'(0)\\&+[s-i(1-P)\omega^{X}]^{-1}i(1-P)\omega^{X}\overline{A}(s),\end{aligned} \tag{8}$$

これを (7.a)に代入して、一般式

$$\begin{aligned}s\overline{A}(s)-\overline{A}(0)=&iP\omega^{X}\overline{A}(s)\\&+iP\omega^{X}[s-i(1-P)\omega^{X}]^{-1}i(1-P)\omega^{X}\overline{A}(s)\\&+iP\omega^{X}[s-i(1-P)\omega^{X}]^{-1}A'(0)\end{aligned} \tag{9}$$

がえられる。これは次式の Laplace 変換形に他ならぬ。

$$\begin{aligned}\frac{d\overline{A}(t)}{dt}=&\ iP\omega^{X}\overline{A}(t)\\&+\int_{0}^{t}dt'iP\omega^{X}\cdot\exp\{it'(1-P)\omega^{X}\}\cdot i(1-P)\omega^{X}\overline{A}(t-t')\\&+iP\omega^{X}\cdot\exp\{it(1-P)\omega^{X}\}A'(0)\end{aligned} \tag{9'}$$

ここで、Pを具体化する。それが射影演算子であることにより、$P^2=P$，$P^*=P$ およびノルムについて $\|P\|=1$ である。

われわれの統計状態のヒルベルト空間において、Aを射影すべき基底ベクト

ルとして、

$$\vec{a} = [T_r \rho A^+ A]^{-1/2} \cdot A(0) \tag{10.a}$$

をえらぶ。ここにρは密度行列であり、A^+ はAの共役量を示す。また、内積を

$$(\vec{a}, \rho A(t)) = [T_r \rho A^+ A]^{-1/2} \cdot T_r \rho A^+(0) A(t) \tag{10.b}$$

と書くとき、射影演算子は

$$\begin{aligned} PA(t) &= \overline{A}(t) = (\vec{a}, \rho A(t))\vec{a} \\ &= [T_r \rho A^+ A]^{-1} \cdot \{T_r \rho A^+(0) A(t)\} A(0) \end{aligned} \tag{10.c}$$

と具体化できる。これから直ちに、Pは、

$$\begin{aligned} &PA(0) = \overline{A}(0) = A(0), \\ &\text{or} \quad (1-P)A(0) = A'(0) = 0 \end{aligned} \tag{10.d}$$

となるようにえらばれていることがわかる。

(10.d)により、一般式 (9 or 9′) は $\overline{A}(t)$ に関する閉じた式となる。Laplace 変換形で示せば、(9)から次のようになる。

$$\begin{aligned} &s\overline{A}(s) - A(0) \\ &= \{ iP\omega^X + iP\omega^X [s - i(1-P)\omega^X]^{-1} i(1-P)\omega^X \} \\ &\times \overline{A}(s). \end{aligned} \tag{11}$$

いま、(10.c)において

$$\left\{ \begin{aligned} &\overline{A}(s) \equiv \Xi(s) A(0), \\ &\Xi(s) = \int_0^\infty dt\, e^{-st} \Xi(t), \\ &\Xi(t) = [T_r \rho A^+ A]^{-1} \cdot T_r \rho A^+(0) A(t) \end{aligned} \right. \tag{12}$$

により、$\Xi(s)$ を導入すれば、(11)は次式となる。

$$s\Xi(s)-1=\{iP\omega^X-\zeta(s)\}\Xi(s),$$

あるいは

$$\Xi(s)=[s-iP\omega^X+\zeta(s)]^{-1} \tag{13}$$

ただし

$$\zeta(s)=-iP\omega^X[s-i(1-P)\omega^X]^{-1}\cdot i(1-P)\omega^X \tag{14}$$

である。(14)の物理的意義を明らかにすることは、少し先にのばして、(12，13)によつて、射影物理量は求まつたので、これとは直交する補空間の中に迷いこんでしまつている物理量を求め、それを〃補つて〃物理量Aの全集合を回収することを考える。そのためには(8)に着目すればよいのであるが、(9)を求めるために一度使つた式である。すなわち、われわれが観測下においている系の系統的振舞を支えている陰の部分でもあり、この役割を明かにすることが、(14)の意義を明確にすることでもある。

(8)に(10.d)，(12)を使つて次式をえる。

$$A'(s)=[s-i(1-P)\omega^X]^{-1}\cdot i(1-P)\omega^X\Xi(s)A(0) \tag{15.a}$$

ここで

$$[(1-P)\omega^X,\ \Xi(s)]=0 \tag{15.b}$$

を使つて

$$A'(s)=\Xi(s)\cdot[s-i(1-P)\omega^X]^{-1}\cdot i(1-P)\omega^X A(0) \tag{15.c}$$

が求まつた。そこで

$$\begin{aligned}A(s)&\equiv\overline{A}(s)+A'(s)\\&=\Xi(s)\{1+[s-i(1-P)\omega^X]^{-1}\cdot i(1-P)\omega^X\}A(0)\end{aligned} \tag{16}$$

と求まる。

(15)を満している$\Xi(s)$により、PA(s)と(1−P)A(s)とが結合することは、時間相関関数の重要性を如実に示している。

(16)を(13)を用いて書き直し、Aの運動方程式がえられる。

$$sA(s)-A(0)=iP\omega^{x}A(s)-\zeta(s)A(s)+\mathscr{F}(s) \tag{17.a}$$

あるいは

$$\frac{dA(t)}{dt}=iP\omega^{x}A(t)-\int_{0}^{t}dt'\zeta(t-t')A(t')+\mathscr{F}(t) \tag{17.b}$$

ここに

$$\mathscr{F}(s)=[s-i(1-P)\omega^{x}]^{-1}\cdot\mathscr{F}(0) \tag{17.c}$$

$$\mathscr{F}(t)=\exp\{it(1-P)\omega^{x}\}\mathscr{F}(0) \tag{17.d}$$

$$\mathscr{F}(0)=i(1-P)\omega^{x}A(0)=(1-P)\dot{A}(0) \tag{17.e}$$

また、(17.e)の両辺に左から(1−P)を作用し、$(1-P)^2=(1-P)$に留意して、

$$\mathscr{F}(0)=\dot{A}(0) \tag{17.f}$$

(14)の物理的意義を明らかにすることは、(17.a)において$\mathscr{F}(s)$と$\zeta(s)$との関係を明確にすること、すなわち、(17.a)が、森氏が最近見出されたLangevinの式の一般形(2)となつているかどうかを調べることである。

(17.c)において、

$$\begin{aligned}&[s-i(1-P)\omega^{x}]^{-1}\cdot i(1-P)\omega^{x}\\&\quad=\mathscr{F}(s)\cdot A^{-1}(0)\end{aligned}$$

であるから、(14)は次のようになる。

$$\begin{aligned}\zeta(s)&=-iP\omega^{x}\mathscr{F}(s)\cdot A^{-1}(0)\\&=-[T_{r}\rho A^{+}A]^{-1}\cdot\{T_{r}\rho A^{+}(0)\,i\,\omega^{x}\mathscr{F}(s)\}\\&=[T_{r}\rho A^{+}A]^{-1}\cdot\{T_{r}\rho A^{+}(0)\mathscr{F}(s)\}\end{aligned} \tag{18.a}$$

$$= [T_r \rho A^+ A]^{-1} \cdot \{T_r \rho \mathscr{F}^+(0) \mathscr{F}(s)\} \tag{18.b}$$

あるいは、

$$\zeta(t) = [T_r \rho A^+ A]^{-1} \cdot \{T_r \rho \mathscr{F}^+(0) \mathscr{F}(t)\} \tag{18.c}$$

$\zeta(t)$は (17.b)の$\mathscr{F}$の時間相関関数によつて与えられる抵抗係数であり、$\mathscr{F}(t)$は正しく揺動項である。(17.a,b) は森氏のLangevin 運動方程式と同一物である。

一方、(17.c,d)において $\mathscr{F}(s) \neq \dot{A}(s)$, $\mathscr{F}(t) \neq \dot{A}(t)$ であるが、

$$\begin{aligned}\mathscr{F}(t) &= \exp\{it(1-P)\omega^X\}(1-P)\dot{A}(0)\\ &\fallingdotseq (1-P)\exp(it\omega^X)\dot{A}(0)\\ &\quad + O(P\ddot{A})\end{aligned} \tag{19}$$

の近似のもとに

$$\mathscr{F}(t) \fallingdotseq \dot{A}(t) \tag{20}$$

が示される。これを (18.a)に用いて

$$\zeta(t) \fallingdotseq [T_r \rho A^+ A]^{-1} \cdot \{T_r \rho \dot{A}^+(0) \dot{A}(t)\} \tag{21}$$

が示される。

これまで (21)を厳密と考え、(18.c)を近似的と考えていたが、逆であることがわかる。

Abel limit としての定常過程の関係

まず、(13)の $s \longrightarrow +0$ の極限において、次式が成立する。

$$\lim_{s \to +0} \int_0^\infty dt\, e^{-st} T_r \rho A^+(0) A(t)$$

$$= \int_0^\infty dt \exp(-t/\tau) T_r \rho A^+(0) A(0) \tag{22}$$

ここに緩和時間τは、次式で与えられる。

$$\tau = \{-iP\omega^{x} + \zeta_{st}\}^{-1} \tag{22.a}$$

$$\zeta_{st} = \lim_{s\to+0} \int_0^\infty dt\, e^{-st} \{T_r \rho \mathscr{F}^{+}(0)\mathscr{F}(t)\} \times [T_r \rho A^{+}A]^{-1} \tag{22.b}$$

(22.a)において

$$-iP\omega^{x} = [T_r \rho A^{+}A]^{-1} \cdot T_r \rho \dot{A}^{+}(0)A(0)$$

であるから、次のEinsteinの関係が示される。

$$\{T_r \rho A^{+}A\}/\tau = T_r \rho \mathscr{F}^{+}(0)A(0) + \lim_{s\to+0} \int_0^\infty dt\, e^{-st} T_r \rho \mathscr{F}^{+}(0)\mathscr{F}(t) \tag{23}$$

以上。

終りに、$\overline{A}(t) = PA(t)$ に関する閉じた運動方程式である (11)は

$$d\overline{A}(t)/dt = iP\omega^{x}\overline{A}(t) - \int_0^t dt'\, \zeta(t-t')\overline{A}(t')$$

with $\quad \overline{A}(0) = A(0)$

であるが、これから射影操作をはずすとき、Langevinの運動方程式 (17.b)が現われ、力学的因果関係が完結するものと考えられる。

最後に、当研究室清山哲郎教授の不断のはげましに対して深謝する。

文　　献

(1) R. Zwanzig, J. Chem. Phys., 33, 1338 (1960).
(2) H. Mori, Prog. Theor. Phys., 33, 423 (1965).
なお、久保教授、講義ノート「統計力学」(最終回) 物研、4, 187 (1965) 参照。